

Nueva Espectroscopía Relativista de Zeeman aplicada al Hidrógeno Atómico.

por

M. W. Evans y H. Eckardt,
Civil List, AIAS y UPITEC

(www.webarchive.org.uk, www.aias.us, www.atomicprecision.com , www.upitec.org
www.et3m.net)

Traducción: Alex Hill (www.et3m.net)

Resumen.

Se infiere una nueva clase de espectroscopía de Zeeman al observarse que el principal término de energía cinética en la ecuación del fermion de la teoría ECE (o ecuación quiral de Dirac) se define mediante momento relativista. Se calcula el factor de Lorentz sin la utilización de la aproximación gruesa de Dirac, la cual reduce el momento relativista al momento clásico. La cuantización muestra que el efecto Zeeman desarrolla una nueva e intrincada estructura espectral, la cual se ejemplifica con las transiciones 2p a 3d (visible) y 4p a 5d (infrarrojo) del hidrógeno atómico. La primera se parte en nueve líneas, mientras que la segunda lo hace en cuarenta y cinco líneas. Éstas pueden resolverse mediante técnicas de doble resonancia, proporcionando así una espectroscopía enteramente novedosa.

Palabras clave: teoría ECE2, ecuación del fermion de la teoría ECE, nueva espectroscopía de Zeeman.

1. Introducción.

En documentos recientes de esta serie [1-12] se han desarrollado en forma sistemática las consecuencias de la teoría ECE2, en los documentos UFT313 a 321 y UFT322 a 330. La característica principal de la teoría ECE2 es que sus ecuaciones de campo poseen la misma estructura que las ecuaciones de campo de Maxwell Heaviside (MH), de manera que la teoría ECE2 tiene la propiedad de ser covariante según Lorentz en un espacio en el que tanto la torsión como la curvatura son distintas de cero. Por lo tanto, la teoría ECE2 puede desarrollarse con las conocidas ecuaciones de la relatividad restringida, con la agregada ventaja de ser capaz de definir los cuatro potenciales del electromagnetismo y la gravitación en función de la torsión y curvatura del espaciotiempo. Por lo tanto, éstas últimas se tornan rutinariamente visibles mediante conocidas técnicas espectrales basadas en la relatividad restringida, en especial la estructura fina en espectros atómicos y moleculares, REE, RMN e IRM.

En este documento, se muestra que la conocida partición de Zeeman de los espectros atómicos mediante un campo magnético posee una hasta ahora desconocida contraparte relativista, la cual produce una estructura fina muy rica y enteramente novedosa. Esta última estructura puede resolverse mediante conocidas técnicas de doble resonancia, y resulta de inmediato interés en el laboratorio analítico. En la Sección 2, se muestra que esta estructura fina es el resultado de un correcto desarrollo del término principal de energía cinética de la ecuación del fermión a través de momento lineal correctamente relativista. El factor de Lorentz del momento relativista se calcula descartando la cruda aproximación de Dirac y sustituyéndola con la correcta definición del factor de Lorentz en términos de la velocidad y momento clásicos. Con la cuantización, esto conduce a una nueva clase de efecto Zeeman, en el cual la degeneración energética del efecto Zeeman no relativista se elimina, resolviendo así muchas nuevas líneas. La teoría se ilustra con las transiciones $2p$ a $3d$ y $4p$ a $5d$ del hidrógeno atómico (H). En la Sección 3, estos nuevos espectros se calculan e ilustran como diagramas de niveles de energía.

Este documento es una sinopsis de cálculos detallados incluidos en las Notas de Acompañamiento del UFT331 en el portal www.aias.us. En la Nota 331(1) se define el término responsable del efecto Zeeman. En las Notas 331(2) y 331(4) se lleva a cabo el primer intento de cuantización de este término, cuya versión final se incluye en la Nota 331(5) y se utiliza en la Sección 2. Las Notas 331(3), 331(6) y 331(7) deducen el nuevo espectro Zeeman relativista en términos de niveles de energía.

2. El Nuevo Efecto Zeeman Relativista.

La teoría tradicional del efecto Zeeman se basa en el hamiltoniano clásico:

$$H_0 = T + U \quad (1)$$

donde T es la energía cinética y U es la energía potencial. La energía cinética clásica se define mediante:

$$T = \frac{p_0^2}{2m} \quad (2)$$

La influencia del campo magnético se define a través de la prescripción mínima:

$$\underline{p}_0 \longrightarrow \underline{p}_0 - e \underline{A} \quad (3)$$

donde \underline{A} es el potencial vectorial y e la carga del protón, siendo $-e$ la carga del electrón. La masa del electrón se indica como m . La cuantización no relativista utiliza la regla de Schrodinger:

$$\underline{p}_0 \psi = -i\hbar \nabla \psi \quad (4)$$

donde ψ es la función de onda no relativista. Tal como se muestra en detalle en la Nota 331(1), la teoría no relativista contiene un término:

$$H_1 = -\frac{e}{m} \underline{A} \cdot \underline{p}_0 \quad (5)$$

en el que el potencial vectorial de un campo magnético estático se define como:

$$\underline{A} = \frac{1}{2} \underline{B} \times \underline{r} \quad (6)$$

de manera que el término (5) deviene:

$$\begin{aligned} H_1 &= -\frac{e}{2m} \underline{B} \times \underline{r} \cdot \underline{p}_0 = -\frac{e}{2m} \underline{B} \cdot \underline{r} \times \underline{p}_0 \\ &= -\frac{e}{2m} \underline{B} \cdot \underline{L}_0 \end{aligned} \quad (7)$$

donde:

$$\underline{L}_0 = \underline{r} \times \underline{p}_0 \quad (8)$$

es el momento angular orbital. Como se muestra en el documento UFT330, el hamiltoniano clásico (1) es el límite del hamiltoniano relativista:

$$H_0 = H - mc^2 = \frac{p^2}{(1+\gamma)m} + U \sim \frac{p^2}{2m} \left(1 - \left(\frac{\langle \hat{H}_0 \rangle - U}{2mc^2} \right) \right) + U \quad (9)$$

Por lo tanto, el hamiltoniano relativista puede expresarse como:

$$H_0 = H - mc^2 \sim \frac{p^2}{2m} + U - \dots \quad (10)$$

Nótese cuidadosamente que el p definido en la Ec. (10) es el momento RELATIVISTA:

$$\underline{p} = \gamma \underline{p}_0 \quad (11)$$

en el que el factor de Lorentz es

$$\gamma = \left(1 - \frac{p_0^2}{m^2 c^2}\right)^{-1/2} \quad (12)$$

Por lo tanto, el hamiltoniano relativista que gobierna el efecto Zeeman es como el definido y desarrollado en la Nota 331(5):

$$\begin{aligned} H_1 &= -\frac{e}{2m} \left(1 - \frac{p_0^2}{m^2 c^2}\right)^{-1/2} \underline{L}_0 \cdot \underline{B} \\ &\sim -\frac{e}{2m} \left(1 + \frac{1}{2} \frac{p_0^2}{m^2 c^2}\right) \underline{L}_0 \cdot \underline{B} \end{aligned} \quad (13)$$

cuando

$$p_0 \ll mc. \quad (14)$$

Este hamiltoniano se cuantiza utilizando:

$$\hat{H}_1 \psi = -\frac{e}{2m} \left(1 + \frac{1}{2} \frac{p_0^2}{m^2 c^2}\right) \underline{B} \cdot \hat{\underline{L}}_0 \psi \quad (15)$$

en donde \underline{L}_0 es un operador y p_0^2 es una función.

Alineando el campo magnético según el eje Z para obtener:

$$\hat{H}_1 \psi = -\frac{e}{2m} \left(1 + \frac{1}{2} \frac{p_0^2}{m^2 c^2}\right) B_z \hat{L}_{0z} \psi \quad (16)$$

donde

$$\hat{L}_{oz} = m_L \hbar \psi \quad (17)$$

con

$$m_L = -L, \dots, L \quad (18)$$

Aquí, \hbar es la constante reducida de Planck, L es el número cuántico del momento angular orbital, y m_L el número cuántico azimutal. Los niveles de energía vienen dados por el valor esperado:

$$H_i = \langle \hat{H}_i \rangle = -\frac{e\hbar}{2m} \left(1 + \frac{1}{2} \frac{p_o^2}{m^2 c^2} \right) m_L \quad (19)$$

en donde:

$$\frac{p_o^2}{2m} = \left\langle \frac{\hat{p}_o^2}{2m} \right\rangle. \quad (20)$$

Por lo tanto, los niveles de energía son:

$$\begin{aligned} H_i &= -\frac{e\hbar}{2m} m_L \left(1 + \frac{1}{m c^2} \left\langle \frac{\hat{p}_o^2}{2m} \right\rangle \right) \\ &= -\frac{e\hbar}{2m} m_L \left(1 - \frac{\hbar^2}{4m^2 c^2} \int \psi^* \nabla^2 \psi d\tau \right) \end{aligned} \quad (20b)$$

En un desarrollo riguroso ψ debe de ser la función de onda relativista de un átomo o molécula.

Para ilustrar la nueva espectroscopía, consideremos el átomo más sencillo, el hidrógeno atómico H, y aproximemos las funciones de onda relativistas con las funciones de onda hidrogenicas no relativistas. En H esto resulta una aproximación plausible, porque la partición de la estructura fina de la órbita de espín es pequeña. De manera que para el H en esta aproximación:

$$\left\langle \frac{\hat{p}_o^2}{2m} \right\rangle = \frac{m e^4}{32 \pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2 n^2} \quad (21)$$

y el hamiltoniano del efecto Zeeman relativista es:

$$H_1 = \frac{e\hbar}{2m} m_L \left(1 + \frac{e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2 c^2 n^2} \right) \quad (22)$$

Aquí, ϵ_0 es la permitividad en el vacío en unidades del S.I, c es la velocidad de la luz en el vacío y n es el número cuántico principal. El resultado (22) puede expresarse como:

$$H_1 = -\frac{e\hbar}{2m} m_L \left(1 + \frac{1}{2} \left(\frac{\lambda_C}{a_0} \right) \frac{\alpha}{n^2} \right) \quad (23)$$

donde

$$\lambda_C = \frac{\hbar}{mc} = 3.861591 \times 10^{-13} \text{ m} \quad (24)$$

es la longitud de onda de Compton, donde

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2} = 5.29177 \times 10^{-4} \text{ m} \quad (25)$$

es el radio de Bohr, y donde

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\hbar c \epsilon_0} = 0.007297351 \quad (26)$$

es la constante de estructura fina. De manera que el hamiltoniano del efecto Zeeman relativista es:

$$H_1 = \langle H_1 \rangle = -\frac{e\hbar}{2m} m_L B_z \left(1 + \frac{2.662567 \times 10^{-5}}{n^2} \right) \quad (27)$$

Esto se agrega a los niveles de energía del átomo de H.

En la primera aproximación, supongamos que estos niveles de energía son los no relativistas:

$$E_0 = -\frac{me^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2 n^2} \quad (28)$$

Por lo tanto, el efecto Zeeman no relativista habitual es:

$$E_1 = E_0 - \frac{e\hbar}{2m} m_L B_z \quad (29)$$

y el nuevo efecto Zeeman relativista es:

$$E_z = E_0 - \frac{e\hbar}{2m} m_L B_z \left(1 + \frac{2.66567 \times 10^{-5}}{n^2} \right) \quad (30)$$

Las reglas de selección para una transición entre niveles de energía son:

$$\Delta L = \pm 1 \quad (31)$$

y

$$\Delta m_L = 0, \pm 1 \quad (32)$$

Para una absorción, un electrón en un nivel inferior de energía se ve promovido a un nivel superior, de manera que:

$$\Delta L = 1. \quad (32.b)$$

La regla de selección (32) significa que Δm_L es igual a cero para polarización lineal, 1 para polarización circular hacia la izquierda y -1 para radiación con polarización circular hacia la derecha.

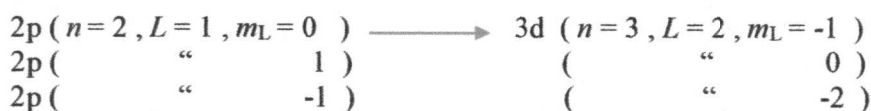
Consideremos ahora la línea alfa de H del hidrógeno atómico en la serie de Balmer de espectros atómicos. La línea alfa de H es el resultado de una transición de 2p a 3d y sucede a $15,241.4 \text{ cm}^{-1}$ en la parte roja del espectro visible. El diagram de Grotian o transiciones posibles se define como sigue. Para polarización circular hacia la izquierda ($\Delta m_L = 1$):



Para polarización lineal ($\Delta m_L = 0$):



Para una polarización circular en ocho ($\Delta m_L = -1$):



Utilizando estas reglas en el hamiltoniano de Zeeman no relativista (29) produce tres líneas de absorción ($\Delta m_L = -1, 0, 1$), ilustradas en la Sección 3. Cada una de estas líneas está conformada por transiciones triplemente degeneradas que ocurren con la misma energía. De anera que el espectro de Zeeman no relativista habitual consiste de tres líneas, una a la frecuencia original, una a una frecuencia mayor y una a una frecuencia menor. Las tres líneas tienen una disposición simétrica.

Sin embargo, el nuevo hamiltoniano relativista (30) produce un hasta ahora desconocido espectro de nueve líneas, tal como se ilustra en la Sección 3, porque se elimina la triple degeneración. Hay un agrupamiento simétrico central, y dos agrupamientos asimétricos, los cuales son imágenes especulares entre sí. Estas agrupaciones se encuentran dentro del rango de espectroscopía de doble resonancia de ultra alta resolución.

Finalmente, la Nota 313(7) ilustra las nuevas particiones relativistas en la transición de $n=4$ a $n=5$ del hidrógeno atómico a $2,469.1 \text{ cm}^{-1}$ en el infrarrojo. Hay diecisiete transiciones degeneradas, como sigue ($\Delta m_L = 1$):

- | | | | |
|-------|--------------------------------|-------------------|--------------------|
| 1) | 4s a 5p ($n=4, L=0, m_L=0$) | \longrightarrow | $n=5, L=1, m_L=1$ |
| 2) | 4p a 5s ($n=4, L=1, m_L=-1$) | \longrightarrow | $n=5, L=0, m_L=0$ |
| * 3) | 4p a 5d ($n=4, L=1, m_L=-1$) | \longrightarrow | $n=5, L=2, m_L=0$ |
| * 4) | " (" 0 | | " 1) |
| * 5) | " (" 1 | | " 2) |
| * 6) | 4d a 5f ($n=4, L=2, m_L=-2$) | \longrightarrow | $n=5, L=3, m_L=-1$ |
| * 7) | " (" -1 | | " 0) |
| * 8) | " (" -0 | | " 1) |
| * 9) | " (" 1 | | " 2) |
| * 10) | " (" 2 | | " 3) |
| * 11) | 4f a 5g ($n=4, L=3, m_L=-3$) | | $n=5, L=4, m_L=-2$ |
| * 12) | " (" -2 | | " -1) |
| * 13) | " (" -1 | | " 0) |
| * 14) | " (" 0 | | " 1) |
| * 15) | " (" 1 | | " 2) |
| * 16) | " (" 2 | | " 3) |
| * 17) | " (" 3 | | " 4) |

Para absorción ($\Delta L = 1$) hay quince transiciones degeneradas, marcadas con un asterisco. Por lo tanto, el hamiltoniano no relativista (29) produce tres líneas de Zeeman, cada una de las cuales son degeneradas quince veces. El hamiltoniano relativista (30) produce cuarenta y cinco líneas en tres agrupaciones de quince líneas, como se ilustra en la Sección 3, es decir, un espectro muy rico que puede emplearse para propósitos analíticos mediante la utilización de

espectroscopía de doble resonancia y resolución ultra elevada.

En general, para una absorción de n a $n + 1$ del hidrógeno atómico, hay $3(n^2 - 1)$ líneas de absorción en el nuevo efecto Zeeman relativista. De manera que para la transición de $n = 13$ a $n = 14$ que sucede a 81.52 cm^{-1} en el infrarrojo lejano hay 804 líneas, en tres agrupaciones de 268 líneas cada una.

Tomando en cuenta que el H es el átomo más sencillo, y que ésta es una sencilla teoría de primera aproximación, se vuelve claro que se ha inferido una nueva espectroscopía de gran utilidad. Esto constituye también una rigurosa evaluación de la aproximación de Dirac y de los aspectos fundamentales de la mecánica cuántica relativista.

3. Diagramas de Niveles de Energía.

Se han calculado las energías de las transiciones descritas en la Sección 2. En incluyeron en las Ecs.(29, 30) las energías no relativistas E_1 y las nuevas energías relativistas E_2 del efecto Zeeman. La nueva partición depende del número cuántico magnético mL como de costumbre y, además, del número cuántico principal n . No existe dependencia respecto del número cuántico angular l . Por lo tanto, resulta suficiente considerar las transiciones con el valor de l para números cuánticos principales n_1 y n_2 . Por ejemplo, las particiones de la transición

$$3p \longrightarrow 4d$$

están contenidas en

$$3d \longrightarrow 4f$$

para todos los valores posibles de mL y reglas de selección $\Delta mL = 0, \pm 1$. Para comparación de los resultados, se representaron gráficamente las diferencias de energía relativas relacionadas con el caso no relativista. Para un estado inicial i y un estado final f la diferencia de energía observable mediante espectroscopio es

$$\Delta E = E_f - E_i.$$

(33)

Esta diferencia, que da la nueva partición de Zeeman, se relaciona primariamente con el caso no relativista. Luego se normaliza la partición dividiendo por $e\hbar/(2m)$, de manera de obtener un número adimensional para la partición:

$$\Delta E_{\text{rel}} = \frac{2m}{e\hbar} (E_f - E_i - (E_{f\text{no rel}} - E_{i\text{no rel}})).$$

(34)

Las Figs. 1-12 muestran todas las particiones posibles con $\Delta l = 1$ (absorción) y $\Delta mL = 0, \pm 1$ para números cuánticos principales vecinos, es decir $n_1 = 1 \rightarrow n_2 = 2, n_1 = 2 \rightarrow n_2 = 3$, etc. Los diagramas son independientes para cada una de las reglas de selección $\Delta mL = 0, \pm 1$ que

corresponden a luz con polarización lineal y circular, tal como ya se explicó en la Sección 2. Para fines comparativos, se seleccionó la escala del eje y igual para todos los diagramas. Para la transición $1s \rightarrow 2p$ sólo hay un cambio para $\Delta m_L = \pm 1$ y ninguna partición, porque hay una sola transición. La transición para $\Delta m_L = 0$ permanece sin cambios debido a que $m_L = 0$. En general, la partición es $(2l - 1)$ veces, donde l es el número cuántico del estado final. Los términos se representan gráficamente en las Figs. 3-12. Puede verse que la partición se vuelve más pequeña para mayores valores de n . Esta es una consecuencia del factor $1/n^2$ en la Ec.(30).

Además de las transiciones entre número cuánticos principales vecinos, también se han investigado dos casos con diferencias más grandes:

$$2p \longrightarrow 4d$$

y

$$2p \longrightarrow 5d$$

ver las Figs. 13 y 14, representadas gráficamente sólo para a regla de selección $\Delta m_L = -1$. Estos diagrams debieran de compararse con la Fig. 4, la cual describe la partición correspondiente para $2p \rightarrow 3d$. El ancho de la partición se ve algo agrandado, y la partición se desplaza al centro para transiciones a valores mayores de n . Otro resultado general es que la partición siempre resulta equidistante.

Los cálculos se efectuaron mediante un programa de Maxima, el cual calcula transiciones entre niveles de energía para el hidrógeno con graficación automática. El programa puede obtenerse de estos autores por solicitud.

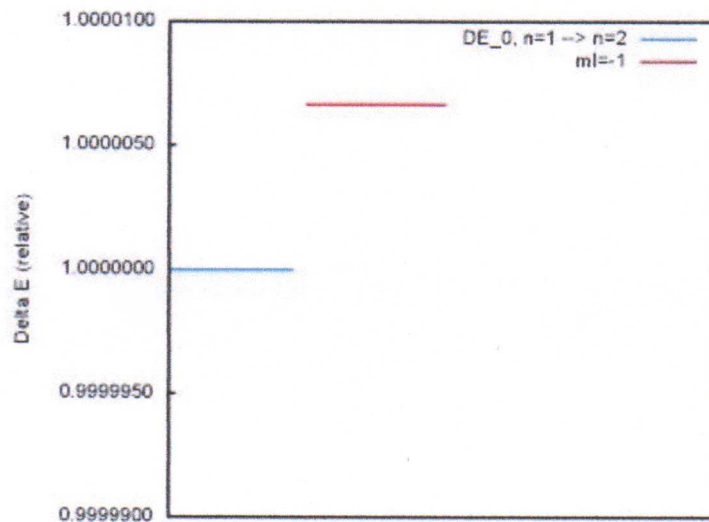


Figura 1: Esquema de términos para $n = 1 \rightarrow 2$, $\Delta m_L = -1$.

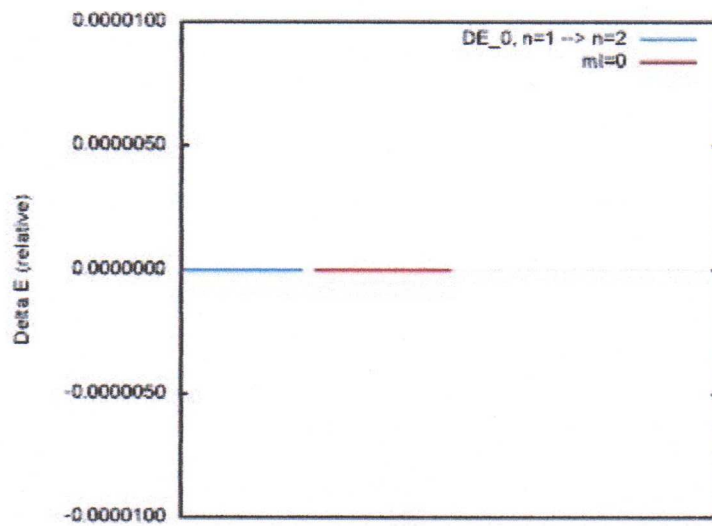


Figura 2: Esquema de términos para $n = 1 \rightarrow 2$, $\Delta m_L = 0$.

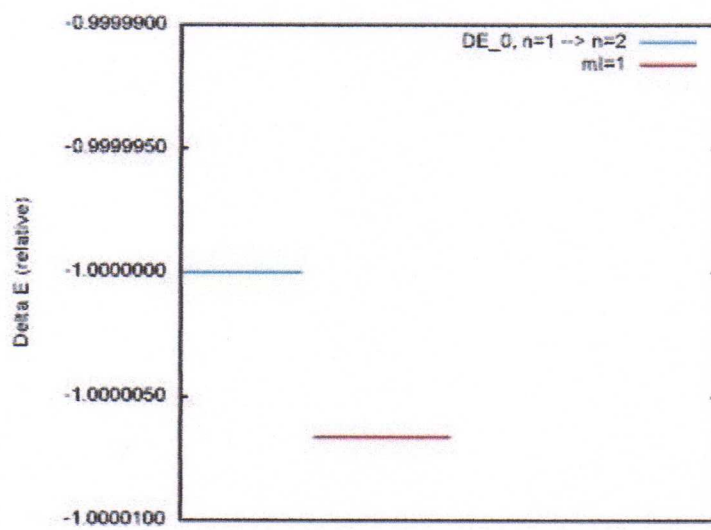


Figura 3: Esquema de términos para $n = 1 \rightarrow 2$, $\Delta m_L = 1$.

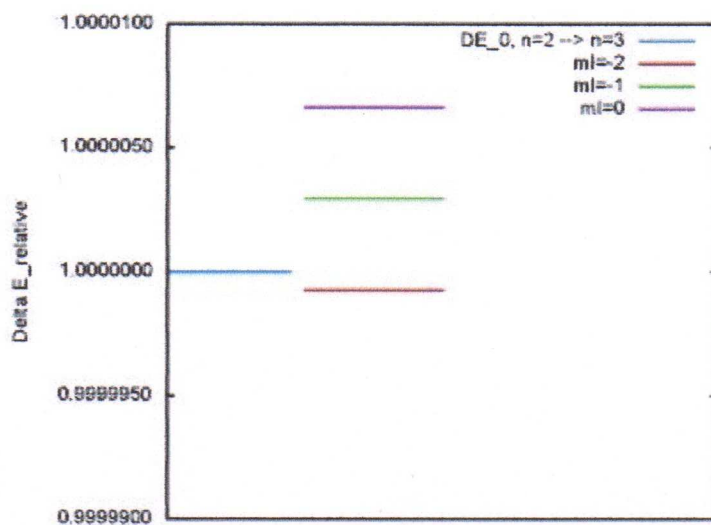


Figura 4: Esquema de términos para $n = 2 \rightarrow 3$, $\Delta m_L = -1$.

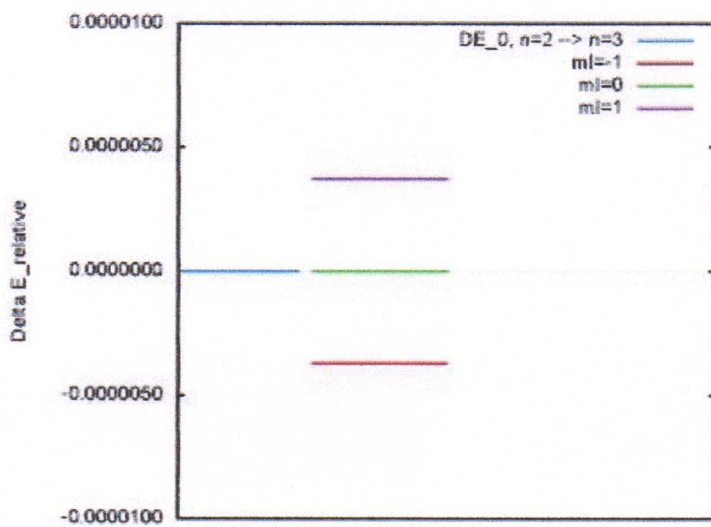


Figura 5: Esquema de términos para $n = 2 \rightarrow 3$, $\Delta m_L = 0$.

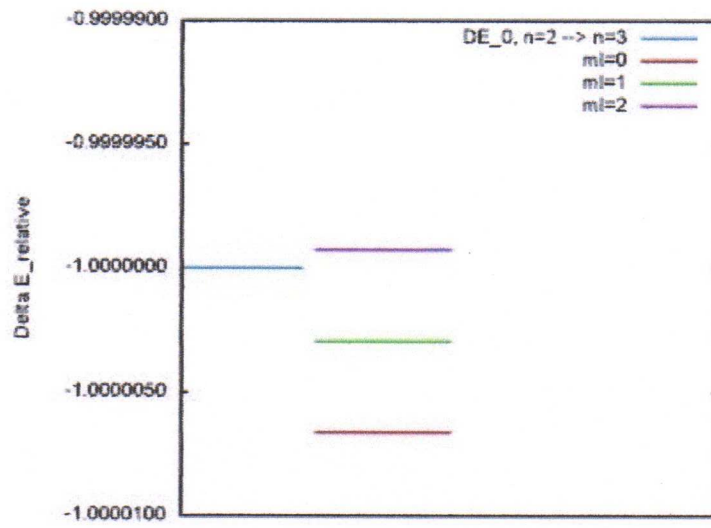


Figura 6: Esquema de términos para $n = 2 \rightarrow 3$, $\Delta m_L = 1$.

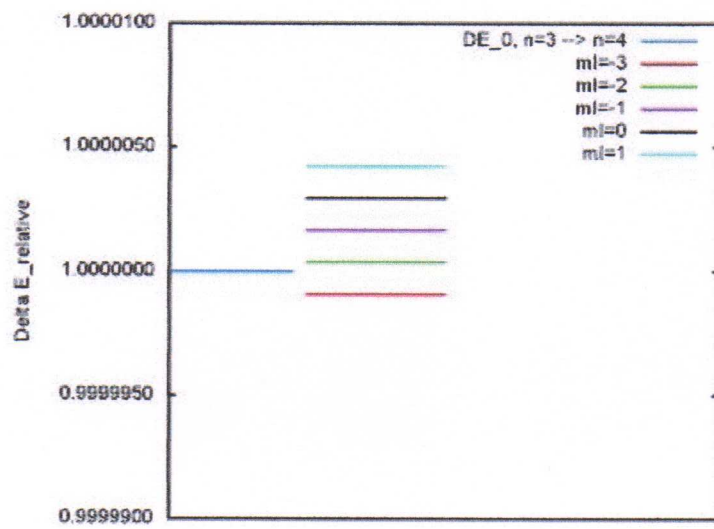


Figura 7: Esquema de términos para $n = 3 \rightarrow 4$, $\Delta m_L = -1$.

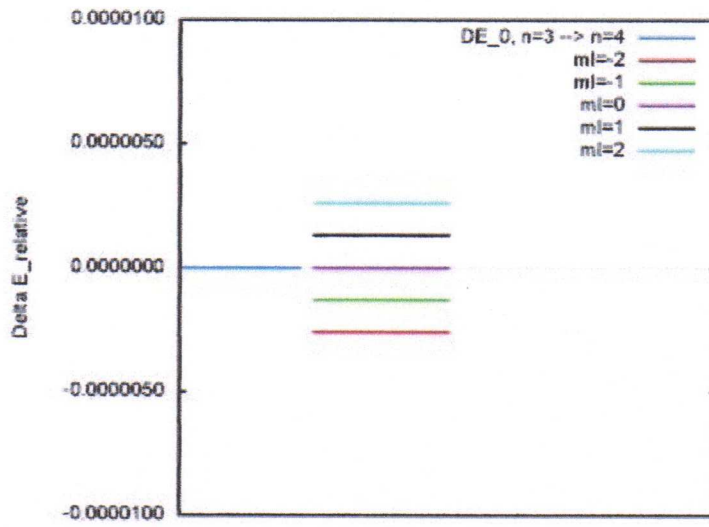


Figura 8: Esquema de términos para $n = 3 \rightarrow 4$, $\Delta m_L = 0$.

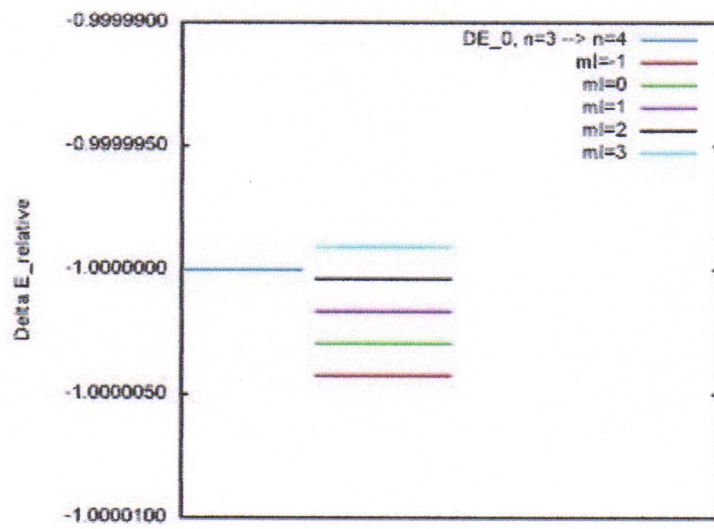


Figura 9: Esquema de términos para $n = 3 \rightarrow 4$, $\Delta m_L = 1$.

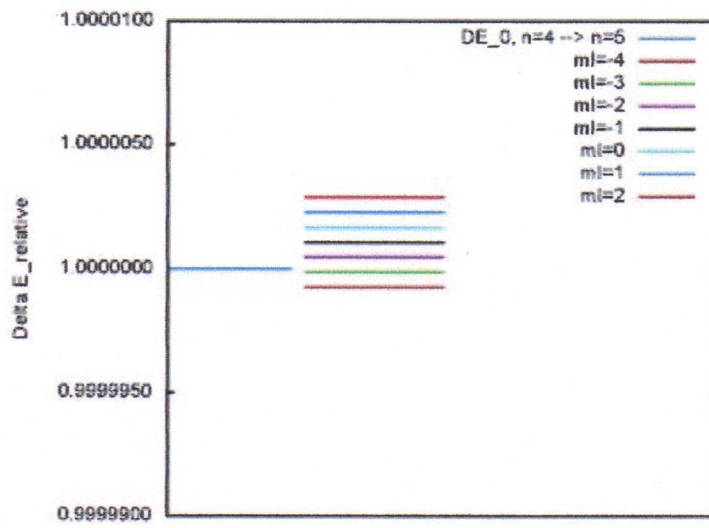


Figura 10: Esquema de términos para $n = 4 \rightarrow 5$, $\Delta mL = -1$.

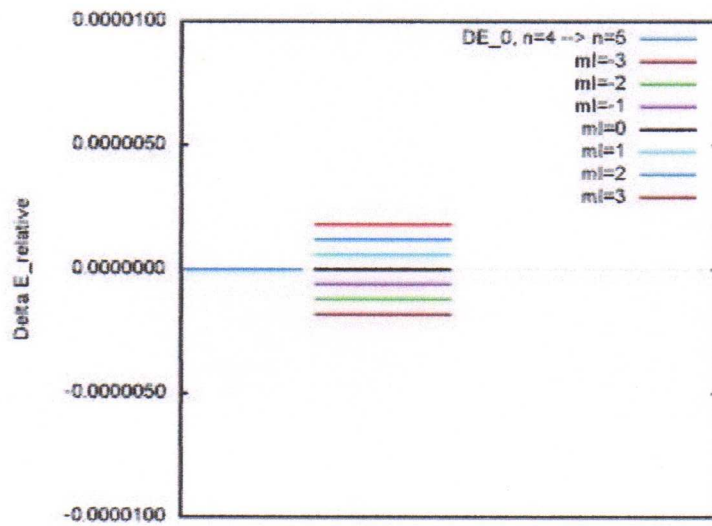


Figura 11: Esquema de términos para $n = 4 \rightarrow 5$, $\Delta mL = 0$.

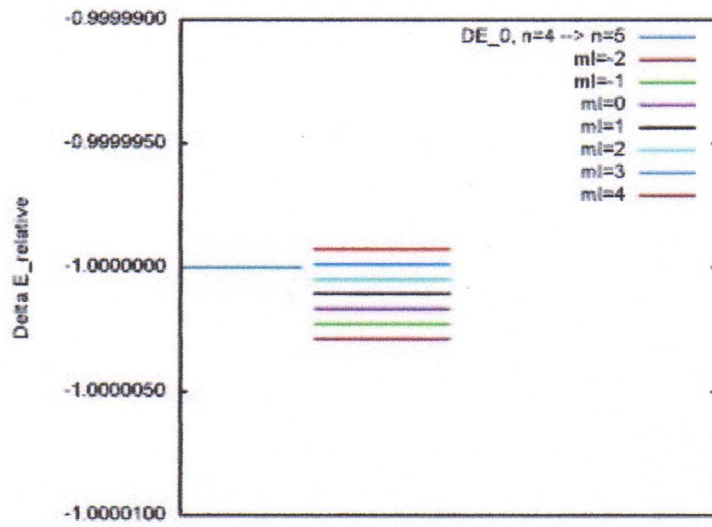


Figura 12: Esquema de términos para $n = 4 \rightarrow 5$, $\Delta mL = 1$.

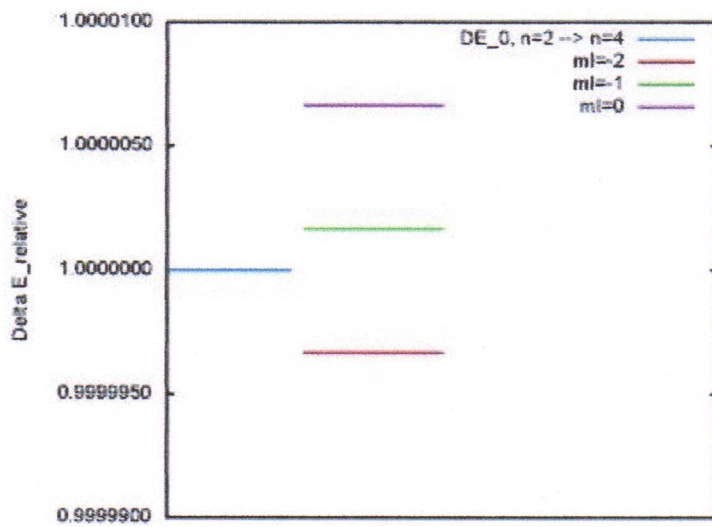


Figura 13: Esquema de términos para $n = 2 \rightarrow 4$, $\Delta mL = -1$.

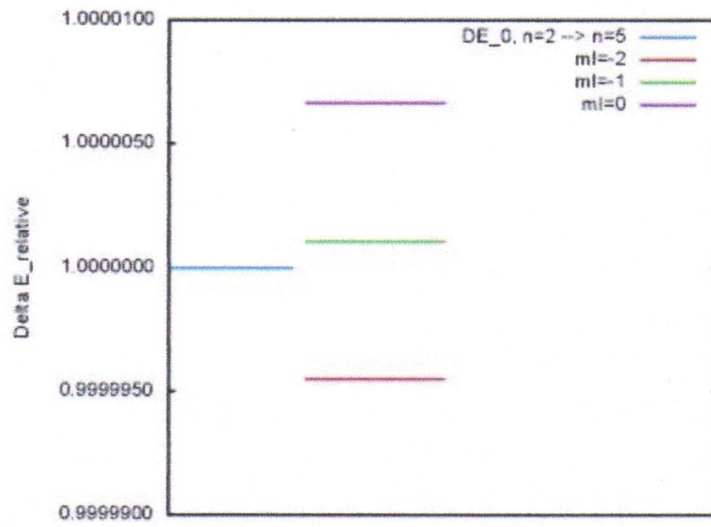


Figura 14: Esquema de términos para $n = 2 \rightarrow 5$, $\Delta m_L = -1$.

Agradecimientos.

Se agradece al Gobierno Británico por la Pensión Civil Vitalicia, y al equipo técnico de AIAS y otros por muchas discusiones interesantes. Se agradece a Dave Burleigh por el mantenimiento al portal, las publicaciones allí y la programación de registro de la actividad de retroalimentación y su mantenimiento, a Alex Hill por las traducciones y lecturas en idioma castellano y a Robert Cheshire por las lecturas en idioma inglés.

Referencias bibliográficas.

- [1] M .W. Evans, H. Eckardt, D. W. Lindstrom y S. J. Crothers, “The Principles of ECE Theory” (de libre acceso como UFT281 a UFT288 en el portal www.aias.us , New Generation, Londres, en prensa).
- [2] M. W. Evans, “Collected Scientometrics” (UFT307 en el portal www.aias.us, New Generation, 2015).
- [3] M. W. Evans, S. J. Crothers, H. Eckardt y K. Pendergast, “Criticisms of the Einstein Field Equation” (UFT301 y Cambridge International (CISP) 2010).
- [4] L. Felker, “The Evans Equations of Unified Field Theory” (UFT302 y Abramis 2007, traducido al idioma castellano por Alex Hill en la sección Español del portal www.aias.us).
- [5] H. Eckardt, “The ECE Engineering Model” (UFT303, recolección de ecuaciones).
- [6] M. W. Evans, H. Eckardt y D. W. Lindstrom, “Generally Covariant Unified Field Theory” (Abramis 2005 a 2011 en siete volúmenes de libre acceso en el portal www.aias.us).
- [7] M .W. Evans, Ed., J. Found. Phys. Chem., (CISP 2011, de libre acceso en el portal www.aias.us).
- [8] M. W. Evans. Ed., “Definitive Refutations of the Einsteinian General Relativity” (CISP 2012, de libre acceso en el portal www.aias.us).
- [9] M .W. Evans y L. B. Crowell, “Classical and Quantum Electrodynamics and the B(3) Field” (World Scientific 2001 y de libre acceso en la sección Omnia Opera del portal www.aias.us).
- [10] M .W. Evans y S. Kielich, Eds., “Modern Nonlinear Optics” (Wiley Interscience, Nueva York, 1992, 1993, 1997, 2001) en seis volúmenes y dos ediciones.
- [11] M .W. Evans y J.-P. Vigiér, “The Enigmatic Photon” (Kluwer 1994 a 2002 y de libre acceso en la sección Omnia Opera del portal www.aias.us).
- [12] M. W. Evans y A. A. Hasanein, “The Photomagnetron in Quantum Field Theory” (World Scientific 1994).